

# Dynamique moléculaire et réactivité des plasmas. Application à la dégradation des polluants organiques dans l'eau.

Pascal Brault<sup>1</sup>

<sup>1</sup> GREMI, CNRS - Université d'Orléans, BP6744, 45067 ORLEANS Cedex 2

mél: [pascal.brault@univ-orleans.fr](mailto:pascal.brault@univ-orleans.fr)

La Dynamique Moléculaire est une méthode de simulation bien adaptée pour décrire les réactions chimiques aux échelles moléculaires. Elle consiste en la résolution des équations du mouvement de Newton, et donc du calcul des trajectoires d'un ensemble de particules.

$$m_i \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}_i(t) = -\vec{\nabla}_{\vec{r}_i} V(\vec{r}_1(t), \dots, \vec{r}_N(t)) = \vec{F}_i(t), \quad i = 1, \dots, N \quad (1)$$

avec  $\vec{r}_i(t)$  la position des espèces  $i$  au temps  $t$ ,  $V$  est la fonction potentiel d'interaction total et  $\vec{F}_i(t)$  est le champ de force agissant sur les espèces  $i$  au temps  $t$ . Cette technique nécessite donc de connaître les positions et vitesses initiales, que l'on peut déduire relativement facilement des expériences que l'on souhaite décrire. L'ingrédient majeur pour résoudre ces équations est donc la connaissance des potentiels d'interaction (ou des champs de force) entre ces particules.

A ce jour, d'énormes progrès ont été obtenus pour produire des champs de force semi-empiriques adaptés aux réactions chimiques : il s'agit, en plus de décrire la formation/brisure de liaisons, de tenir compte du maximum de liaisons possible pour un atome donné et des charges partielles. Un tel champ de force est appelé réactif à charge variable : les plus utilisés actuellement sont ReaxFF et COMB3 [1]. Quand ces potentiels ne sont pas connus, on peut les calculer à chaque pas de temps ou bien tous les quelques pas de temps par des méthodes quantiques comme la DFT. Cependant cela conduit à un accroissement considérable du temps de calcul.

La Dynamique Moléculaire n'est pas capable actuellement de traiter complètement la dynamique réactive dans un plasma puisque les électrons ne sont pas explicitement pris en compte. Des champs de forces peuvent les inclure comme eFF et eReaxFF, mais la masse de l'électron est égale à 1 pour permettre des temps de calculs raisonnables. Néanmoins, les interactions neutres-neutres et ions-neutres peuvent être abordées de façon très précise et donc moyennant une connaissance « correcte » d'une composition initiale, il devient possible de mener des calculs de réactivité qui peuvent se comparer aux expériences plasma (il est également possible d'inclure un champ électrique). Il est également possible de faire des études paramétriques afin de mieux comprendre le rôle d'espèces particulières dans la réactivité.

Afin d'illustrer cette méthodologie et les capacités de la Dynamique Moléculaire, l'exposé donnera des résultats portant la réactivité de molécules organiques polluantes telles que le paracétamol (anti-douleur) [2] et la sulfaméthoxazole (antibiotique) vis-à-vis du radical hydroxyl (par exemple issu de l'interaction avec un plasma en interaction avec l'eau), dans l'eau. Dans le premier cas, les calculs sont menés avec un potentiel ReaxFF et dans le second avec un couplage chimie quantique (DFTB), pour calculer le potentiel, et Dynamique Moléculaire.

## Références

- [1] T. Liang, Y. K. Shin, D. E. Yilmaz, K. G. Vishnu, O. Veners, C. Zou, S. R. Phillpot, S. B. Sinnott, A. C. T. van Duin, Reactive potentials for advanced atomistic potentials, *Ann. Review of Materials Research* 43, 109 (2013)
- [2] P. Brault, M. Abraham, A. Bensebaa, O. Aubry, D. Hong, H. Rabat, M. Magureanu, Insight into plasma degradation of paracetamol in water using a reactive molecular dynamics approach, *J. Appl. Phys* 129 (2021) 183304

**Statut : Permanent**